

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 372 398**

51 Int. Cl.:
C09K 15/08 (2006.01)
C08K 5/08 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 96 Número de solicitud europea: **05754317 .5**
96 Fecha de presentación: **28.06.2005**
97 Número de publicación de la solicitud: **1784472**
97 Fecha de publicación de la solicitud: **16.05.2007**

54 Título: **COMPOSICIÓN DE CAPTURA DE OXÍGENO Y PROCEDIMIENTO PARA SU REALIZACIÓN.**

30 Prioridad:
28.06.2004 AU 2004903522

45 Fecha de publicación de la mención BOPI:
19.01.2012

45 Fecha de la publicación del folleto de la patente:
19.01.2012

73 Titular/es:
**COMMONWEALTH SCIENTIFIC AND INDUSTRIAL
RESEARCH ORGANISATION
LIMESTONE AVENUE
CAMPBELL, ACT 2601, AU**

72 Inventor/es:
**HORSHAM, Mark, Andrew;
SCULLY, Andrew, David;
MURPHY, James, Keith, Gerard;
SANTANGELO, Ross, Anthony y
MCNALLY, Michael**

74 Agente: **Jorda Petersen, Santiago**

ES 2 372 398 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Composición de captura de oxígeno y procedimiento para su realización.

5 **Campo de la invención**

La presente invención se refiere a un procedimiento de captura de oxígeno mediante composiciones poliméricas que comprenden derivados de antraquinona hidrogenada para su utilización, por ejemplo, en el envasado de alimentos y bebidas con el fin de capturar el oxígeno no deseado que permanece dentro del envase o penetra de cualquier otro modo en el mismo después de envasar el alimento o bebida. El derivado de antraquinona hidrogenada también se puede incorporar en materiales de envasado para capturar el oxígeno que, de otro modo, permearía a través del material y se introduciría en el envase.

15 **Antecedentes de la invención**

Una amplia variedad de alimentos, bebidas, productos farmacéuticos y otros materiales pueden experimentar una pérdida significativa de calidad si se exponen al oxígeno durante su almacenamiento. Los daños se pueden producir, por ejemplo, por la oxidación química del producto y/o por una proliferación microbiana. En el campo del envasado, estos daños se han combatido tradicionalmente generando atmósferas con un contenido relativamente bajo de oxígeno mediante envasado al vacío y/o inyección de un gas inerte. Sin embargo, estos procedimientos no se pueden aplicar de forma generalizada por diversas razones. Por ejemplo, las elevadas velocidades de llenado que se utilizan habitualmente en la industria de los alimentos y las bebidas impiden con frecuencia una evacuación eficaz de los envases de los alimentos y bebidas o una inyección completa de gas inerte en los mismos, y ni la evacuación ni la inyección de un gas inerte proporcionan ninguna capacidad residual para la eliminación del oxígeno que se pueda desorber del contenido del envase o que pueda penetrar en el mismo por fugas o permeación. En consecuencia, existe un gran interés en la identificación y desarrollo de técnicas químicas para la generación de atmósferas con un bajo contenido en oxígeno.

En la patente australiana nº 672.661, el presente solicitante describe composiciones captadoras de oxígeno novedosas que comprenden una fuente de hidrógeno lábil o electrones y un compuesto orgánico reducible que se pueden activar o "accionar" fácilmente (es decir, convertirse en su forma captadora de oxígeno) cuando resulte necesario por exposición, por ejemplo, a luz ultravioleta (UV). Una vez activadas, dichas composiciones captadoras de oxígeno pueden capturar el oxígeno de una atmósfera o un líquido oxigenados en una oscuridad sustancial durante períodos comprendidos entre unos minutos u horas y más de 100 días.

Muchos de los ejemplos de composiciones captadoras de oxígeno descritos en la patente australiana nº 672.661 se basan en antraquinonas sustituidas como compuesto orgánico reducible. Otros ejemplos de antraquinonas sustituidas adecuadas para su utilización como compuesto orgánico reducible en dichas composiciones captadoras de oxígeno se dan a conocer en la solicitud de patente internacional PCT/AU02/00341 (documento WO 02/076916).

Resultan necesarios compuestos y composiciones alternativos útiles para capturar oxígeno y, particularmente, existe una necesidad de compuestos y composiciones que no requieran obligatoriamente una activación posterior a su conformación en materiales de envasado para que capturen el oxígeno.

Además, las antraquinonas sustituidas según la técnica anterior mencionadas anteriormente tienden a ser coloreadas, sobre todo en sus estados reducidos. Las composiciones y los envasados que contienen dichas antraquinonas también tienden a ser coloreados. Por ejemplo, las películas preparadas con composiciones a base de antraquinona pueden adoptar un color amarillo intenso cuando las antraquinonas se reducen para activar su capacidad de captura de oxígeno. La naturaleza coloreada de las composiciones a base de antraquinona no resulta deseable en muchas formas de envasado, particularmente en el envasado de productos alimenticios. Resulta así deseable, aunque no esencial, que los compuestos y composiciones alternativos para la captura de oxígeno tengan, en general, significativamente menos color que las antraquinonas sustituidas según la técnica anterior.

55 **Sumario de la invención**

En un primer aspecto, la presente invención da a conocer una composición polimérica que comprende un derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato o un derivado sustituido del mismo, tal como se define en la reivindicación 1.

En un segundo aspecto, la presente invención da a conocer un procedimiento de captura de oxígeno (particularmente oxígeno molecular en estado fundamental) en una atmósfera o un líquido, que comprende las etapas siguientes:

- (i) proporcionar una composición polimérica según el primer aspecto; y
- (ii) exponer dicha atmósfera o dicho líquido a la composición;

de tal modo que, por lo menos, una parte del oxígeno presente en la atmósfera o el líquido se elimina por oxidación del derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato.

5 En un tercer aspecto, la presente invención da a conocer un procedimiento de prevención de la transmisión del oxígeno (particularmente el oxígeno molecular en estado fundamental) a través de un envase, comprendiendo dicho procedimiento la formación de un envase que comprende o está constituido por un material de envasado, comprendiendo dicho material de envasado una composición polimérica según el primer aspecto.

Breve descripción de las figuras

10 La figura 1 representa un gráfico de transmisión de oxígeno en función del tiempo para películas de EVOH que comprenden 2-Me-THAQ y para películas de EVOH que no comprenden 2-Me-THAQ.

15 La figura 2 representa un gráfico de transmisión de oxígeno en función del tiempo para películas de MXD6 que comprenden THAQ y para películas de MXD6 que no comprenden THAQ.

La figura 3 representa los espectros de absorción UV-visible para la THAQ en (a) isopropanol y (b) DMSO.

20 La figura 4 representa un espectro de absorción de UV-visible para la THAQ en una película de MXD6.

La figura 5 representa un espectro de absorción UV-visible para la 2-Me-THAQ en una película de EVOH.

25 La figura 6 representa los espectros de absorción UV-visible para (a) THAQ (b) 2-Me-THAQ y (c) 2-Me-HHAQ en PETG.

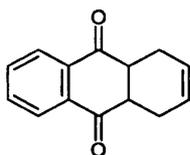
Descripción detallada de la invención

30 En general, los derivados de antraquinona hidrogenada, cuando se encuentran en forma sólida pura, no reaccionan de modo observable con el oxígeno. El presente solicitante ha descubierto, sorprendentemente, que las películas poliméricas formadas por compresión de la masa fundida de derivados de antraquinona hidrogenada con una gama de diferentes polímeros comercialmente disponibles, incluidos copolímeros de etileno-alcohol vinílico (EVOH) y polímeros que comprenden meta-xilenodiamina y ácido adípico (por ejemplo, el nailon MXD-6), absorben oxígeno. Dichas películas no requieren ninguna activación posterior a su procesamiento para que capturen oxígeno.

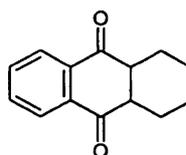
35 Como se puede apreciar en los ejemplos, los espectros de absorción de las películas poliméricas que comprenden THAQ indican la existencia de un derivado químico diferente. El presente solicitante cree que este derivado químico es el tautómero de enol/enolato de la THAQ. Sin pretender limitarse a una teoría, se cree que la presencia de una base, presente en cantidades residuales en algunos polímeros disponibles comercialmente, puede catalizar la formación del tautómero de enol/enolato del derivado de antraquinona hidrogenada y que es esta especie la que absorbe (o captura) el oxígeno. Es conocido que también los ácidos catalizan la tautomerización de las antraquinonas hidrogenadas para obtener sus formas de enol/enolato. También es posible que la eficacia de la formación del tautómero de enol/enolato esté relacionada con la polaridad del polímero y/o la temperatura aplicada en la formación de la composición polimérica.

45 En consecuencia, en un primer aspecto, la presente invención da a conocer una composición polimérica que comprende un derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato o un derivado sustituido del mismo.

50 El derivado de antraquinona hidrogenada comprende uno o más de los compuestos representados por las fórmulas siguientes y los derivados sustituidos de los mismos:



1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona



1,2,3,4,4a,9a-hexahidroantraquinona

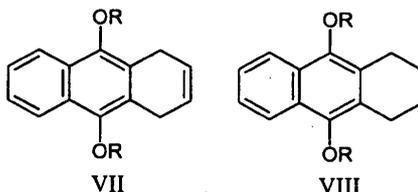
55 Son derivados de antraquinona hidrogenada particularmente preferidos la 1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona (THAQ) y sus derivados sustituidos. Son sustituyentes preferentes los grupos alquilo (particularmente los grupos alquilo C₁₋₆), halo, ácido carboxílico, éster, anhídrido, epoxi, hidroxilo y amino. Un ejemplo de un derivado sustituido es la 2-metil-1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona (2-Me-THAQ).

60 En el contexto de la presente invención se espera que la incorporación directa en una composición polimérica de la forma de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada también dará lugar a una composición

polimérica capaz de capturar oxígeno.

Por lo tanto, en una forma de realización preferida, el derivado de antraquinona hidrogenada y/o su derivado de enol/enolato es un tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada o un derivado sustituido del mismo.

Preferentemente, el tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada se selecciona entre un compuesto con una de las fórmulas VII y VIII y derivados sustituidos del mismo:



donde cada R se selecciona independientemente entre hidrógeno, un ión de carga positiva, un enlace éster y un enlace éter. Más preferentemente, los dos grupos R son hidrógeno o enlaces éster.

Un ión de carga positiva preferido es el Na^+ .

Preferentemente, el compuesto es el de fórmula VII. Más preferentemente, el tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada es la sal disódica de fórmula VII.

Preferentemente, la composición polimérica según el primer aspecto comprende además un ácido o una base. La cantidad de ácido o base que puede estar presente está comprendida preferentemente entre el 0,05% y el 1,0%, y más preferentemente entre el 0,05% y el 0,1% en peso de la composición polimérica.

El experto en la materia conoce sin duda diversos ácidos que resultan adecuados para ser incorporados a cualquier composición polimérica según la presente invención. Los ácidos adecuados comprenden ácidos orgánicos e inorgánicos, tales como ácido clorhídrico, ácido benzoico o ácido p-toluensulfónico, y sales ácidas, tales como cloruro de sodio, sulfato de potasio o cloruro de amonio.

El experto en la materia conoce sin duda diversas bases que resultan adecuadas para ser incorporadas a cualquier composición polimérica según la presente invención. Las bases adecuadas comprenden bases inorgánicas, tales como hidróxido de sodio, y sales básicas, tales como sales metálicas de carboxilatos, carbonatos y bicarbonatos.

Las composiciones poliméricas según el primer aspecto se pueden encontrar en forma sólida, semisólida (por ejemplo, un gel) o líquida (por ejemplo, un líquido polimérico tal como una tinta). Por lo tanto, se pueden aplicar o incorporar, por ejemplo, a revestimientos de cierre de botella, tintas, recubrimientos, adhesivos (por ejemplo, poliuretanos), películas, láminas o capas en recipientes tales como bandejas, botellas o envases blíster, ya sea individualmente o como laminaciones o coextrusiones. Cuando se utilizan en películas o capas, se pueden mezclar con los polímeros o copolímeros habitualmente utilizados para la construcción de películas o capas, tales como los aprobados para el contacto con alimentos o productos farmacéuticos. Dichas películas o capas se pueden producir por extrusión a temperaturas comprendidas entre 50°C y 350°C según la composición química y la distribución de pesos moleculares.

El derivado de antraquinona hidrogenada se puede mezclar con la composición polimérica. La composición polimérica contiene un polímero o mezcla de polímeros seleccionados entre EVOH, poliamidas, poliésteres, polietilenos y alcoholes polivinílicos. Preferentemente, el polímero es EVOH, un polímero que comprende unidades de meta-xilenodiamina y ácido adípico (por ejemplo, MXD-6), o un polímero que comprende unidades de ácido tereftálico y etilenglicol (por ejemplo, PET).

Alternativamente, o adicionalmente, el propio derivado de antraquinona hidrogenada se puede encontrar en una forma polimerizada, ya sea como homopolímero o como copolímero. También pueden resultar adecuadas las formas oligoméricas. Se pueden preparar monómeros basados en un derivado de antraquinona hidrogenada, por ejemplo, enlazando covalentemente un grupo etilénicamente insaturado a un anillo A o C de dicho derivado de antraquinona hidrogenada. El derivado de antraquinona hidrogenada también puede comprender grupos, tales como ácido carboxílico, éster, anhídrido, epoxi, hidroxilo y amino, capaces de reaccionar con otras moléculas polimerizables y polímeros preformados, incluyendo las reacciones que involucran a los grupos hidroxilo del tautómero enólico. Por ejemplo, se considera que un tautómero de enol/enolato puede actuar eficazmente como monómero en un copolímero haciendo de puente entre los dos sustituyentes alcohólicos a través de la formación de enlaces éster o éter.

Las composiciones poliméricas según el primer aspecto pueden capturar oxígeno independientemente de la

presencia de un catalizador de metal de transición. En consecuencia, en una forma de realización preferida, las composiciones poliméricas no comprenden ningún catalizador de metal de transición.

Preferentemente, los derivados de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato para su utilización en el procedimiento según la presente invención son sustancialmente incoloros o exhiben poco color en relación con las antraquinonas (particularmente, la 2-etilantraquinona). Preferentemente, el derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato se seleccionan de tal modo que presentan una absorción máxima en el espectro visible (400 nm - 700 nm) que no es superior a la mitad de la de la forma reducida de la 2-etilantraquinona en EVOH en las mismas condiciones.

En un segundo aspecto, la presente invención da a conocer un procedimiento de captura de oxígeno (particularmente oxígeno molecular en estado fundamental) en una atmósfera o un líquido, que comprende las etapas siguientes:

- (i) proporcionar una composición polimérica según el primer aspecto; y
- (ii) exponer dicha atmósfera o dicho líquido a la composición;

de tal modo que por lo menos una parte del oxígeno presente en la atmósfera o el líquido se elimina por oxidación del derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato.

El experto en la materia conoce sin duda el hecho de que las composiciones poliméricas según el primer aspecto también se pueden utilizar como barrera química frente a la transmisión del oxígeno a través de un material de envasado. De este modo, si un material de envasado tiene una permeabilidad determinada con respecto al oxígeno, el oxígeno que lo atraviesa desde el exterior puede ser capturado por la antraquinona hidrogenada o su tautómero de enol/enolato.

Por lo tanto, en un tercer aspecto, la presente invención da a conocer un procedimiento de prevención de la transmisión del oxígeno (particularmente el oxígeno molecular en estado fundamental) a través de un envase, comprendiendo dicho procedimiento la formación de un envase que comprende o está constituido por un material de envasado, comprendiendo dicho material de envasado una composición polimérica según el primer aspecto.

Para poner más claramente de manifiesto la presente invención, a continuación se describen sus formas anteriores haciendo referencia a los ejemplos no limitativos siguientes.

Ejemplos

Ejemplo 1: captura de oxígeno con una composición que comprende THAQ en EVOH

Se preparó una composición mezclando 1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona (THAQ) en una cantidad de aproximadamente 2% p/p en EVOH comercialmente disponible (32% en moles de contenido de etileno) a 190°C. A continuación, la composición se moldeó por compresión a fin de formar una película con un grosor de aproximadamente 30 µm. A continuación, la película se transfirió rápidamente a una bolsa de aluminio de múltiples capas que a continuación se cerró herméticamente al vacío a fin de formar un envase plano que no contenía esencialmente espacios vacíos. Esta bolsa forrada de aluminio permite que no penetre esencialmente nada de oxígeno de la atmósfera en su interior. A continuación, se inyectó aire a la bolsa forrada de aluminio y la misma se almacenó a temperatura constante. El contenido de oxígeno dentro de la bolsa se determinó por cromatografía de gases. El cambio de la concentración de oxígeno en tres bolsas preparadas del modo descrito anteriormente y almacenadas a 40°C se presenta en la tabla 1. Las películas eran sustancialmente incoloras y continuaron siéndolo tras la exposición al oxígeno.

Tabla 1

Tiempo de almacenamiento (días)	Contenido de oxígeno dentro de la bolsa (%)		
	Bolsa 1	Bolsa 2	Bolsa 3
0	20,9	20,9	20,9
1	20,8	20,8	20,8
2	20,8	20,7	20,7
5	20,6	20,6	20,4
16	20,2	20,0	19,7

Ejemplo 2: Captura de oxígeno con una composición que comprende 2-Me-THAQ en EVOH

La composición se preparó mezclando 2-metil-1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona (2-Me-THAQ) en una cantidad de aproximadamente el 2% p/p en EVOH (44% en moles de contenido de etileno) a 190°C. A continuación, la composición se moldeó por compresión a 190°C a fin de formar películas con un grosor de aproximadamente 50 µm.

A continuación, se transfirió rápidamente cada película a una bolsa de aluminio de múltiples capas que a continuación se cerraron herméticamente al vacío a fin de formar envases planos que no contenían esencialmente espacios vacíos. Estas bolsas forradas de aluminio permiten que no penetre esencialmente nada de oxígeno de la atmósfera en su interior. A continuación se inyectó una mezcla gaseosa de 4% de O₂/96% de N₂ en cada bolsa. A continuación, las bolsas se introdujeron en un horno a 120°C para simular la temperatura del proceso de esterilización. La concentración de oxígeno del espacio vacío se determinó mediante cromatografía de gases. El cambio en la concentración de oxígeno en las bolsas preparadas del modo descrito anteriormente se indica en la tabla 2. Las películas eran sustancialmente incoloras y continuaron siéndolo tras la exposición al oxígeno.

Tabla 2

Tiempo de almacenamiento (minutos)	Contenido de oxígeno dentro de la bolsa (%)					
	Bolsa 1	Bolsa 2	Bolsa 3	Bolsa 4	Bolsa 5	Bolsa 6
0	4,0	4,3	3,7	3,8	3,9	4,7
30	n/r	n/r	2,7	n/r	2,9	3,4
35	3,0	2,8	n/r	n/r	n/r	n/r
60	2,8	n/r	n/r	n/r	2,6	3,1
80	n/r	n/r	1,9	2,5	n/r	n/r

*n/r = no se ha llevado a cabo ninguna medición en estos instantes

Ejemplo 3: Barrera mejorada frente a la permeación del oxígeno con una composición que comprende 2-Me-THAQ en EVOH

Se prepararon películas de EVOH (44% en moles de contenido de etileno) que contenían aproximadamente 2% p/p de 2-Me-THAQ por mezclado de la masa fundida y a continuación compresión de la masa fundida a 190°C. El grosor de las películas estaba comprendido dentro de un intervalo de 40-60 μm y debió repararse en la preparación de películas sin burbujas de aire atrapadas que pudieran interferir en las mediciones. Las mediciones de transmisión de oxígeno se llevaron a cabo utilizando una técnica que consiste en intercalar una película indicadora sensible al oxígeno que contiene rubreno entre dos películas de ensayo a base de EVOH y sellar las tres capas en una celda de ensayo. A continuación, la celda de ensayo se coloca en una cámara iluminada de temperatura/humedad controladas. Los ensayos se llevaron a cabo en aire a 23°C y un 57% de humedad relativa. El color de la película indicadora sensible al oxígeno disminuye en presencia de oxígeno y luz, y este cambio se utiliza para determinar la tasa de permeación del oxígeno a través de las películas de ensayo. La luz de la cámara de almacenamiento se filtró de tal modo que durante los experimentos únicamente recibiera luz el rubreno presente en la película indicadora sensible al oxígeno. Los resultados de los experimentos se indican en la figura 1 y ponen claramente de manifiesto que la incorporación de 2-Me-THAQ en la película de EVOH reduce significativamente la cantidad de oxígeno que se transmite a través de la misma. Las películas eran sustancialmente incoloras y continuaron siéndolo tras la exposición al oxígeno.

Ejemplo 4: Barrera mejorada frente a la permeación del oxígeno con una composición que comprende THAQ en MXD6

Las películas amorfas de MXD6 que contenían aproximadamente 2% p/p de THAQ se prepararon por mezclado de la masa fundida y a continuación compresión de la masa fundida a 250°C. El grosor de las películas estaba comprendido dentro del intervalo 50-70 μm y se tuvo que poner cuidado en preparar películas sin burbujas de aire atrapadas que pudieran interferir en las mediciones. Las mediciones de transmisión de oxígeno se llevaron a cabo utilizando una técnica que consiste en intercalar una película indicadora sensible al oxígeno que contiene rubreno entre dos películas de ensayo a base de MXD6 y sellar las tres capas en una celda de ensayo. A continuación, la celda de ensayo se coloca en una cámara iluminada de temperatura/humedad controladas. Los ensayos se llevaron a cabo en aire a 23°C y un 57% de humedad relativa. El color de la película indicadora sensible al oxígeno disminuye en presencia de oxígeno y luz, y este cambio se utiliza para determinar la permeación del oxígeno a través de las películas de ensayo. La luz de la cámara de almacenamiento se filtró de tal modo que únicamente recibiera luz durante los experimentos el rubreno presente en la película indicadora sensible al oxígeno. La figura 2 pone de manifiesto que la transmisión de oxígeno a través de la película de MXD6 se reduce sustancialmente cuando la película comprende THAQ. Las películas eran sustancialmente incoloras y continuaron siéndolo tras la exposición al oxígeno.

Ejemplo 5: Enolización de THAQ en solución

La figura 3 representa el espectro de absorción de una solución de THAQ disuelta en isopropanol (etiquetada "a") y una solución de THAQ disuelta en DMSO (etiquetada "b"). La diferencia entre el espectro de absorción de la THAQ en isopropanol y la THAQ en DMSO indica la formación de una especie química diferente en DMSO, y se determinó por análisis de RMN ¹H que la identidad de dicha especie era la forma enólica de la THAQ. Se puso de manifiesto que la enolización de la THAQ no tenía lugar en una solución de isopropanol a temperatura ambiente.

Ejemplo 6: Enolización de THAQ en MXD6

La composición se preparó mezclando aproximadamente 2% p/p de THAQ en MXD6 disponible comercialmente seguido de un moldeo por compresión a 250°C a fin de formar una película con un grosor de aproximadamente 50 μm. El espectro de absorción de esta película se muestra en la figura 4. La diferencia entre el espectro de absorción de la THAQ en isopropanol (véase la figura 3, espectro "a") y la THAQ en MXD6 indica la formación de una especie química diferente en MXD6, y dicha nueva especie se asigna a la forma enólica de la THAQ debido a su muy estrecha similitud con el espectro de absorción del tautómero enólico en DMSO, representado en la figura 3, espectro "b".

Ejemplo 7: Enolización de 2-Me-THAQ en EVOH

Se preparó una composición mezclando 2-Me-THAQ en una cantidad de aproximadamente 1% p/p en EVOH comercializado (44% en moles de contenido de etileno) a 190°C. A continuación, la composición se moldeó por compresión a fin de formar una película con un grosor de aproximadamente 75 μm. El espectro de absorción de esta película se muestra en la figura 5. La diferencia entre el espectro de absorción de la THAQ en isopropanol (véase la figura 3, espectro "a") y la 2-Me-THAQ en EVOH indica la formación de una especie química diferente en EVOH, y dicha nueva especie se asigna a la forma enólica de la 2-Me-THAQ debido a su muy estrecha similitud con el espectro de absorción del tautómero enólico de la THAQ en DMSO, mostrado en la figura 3, espectro "b".

Ejemplo 8: Enolización de derivados de antraquinona hidrogenada en PETG

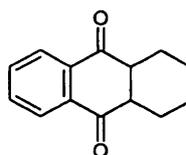
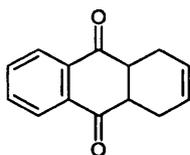
Se prepararon las composiciones mezclando THAQ, 2-Me-THAQ y 2-Me-1,2,3,4,4a,9a-hexahidroantraquinona (2-Me-HHAQ) en una cantidad de aproximadamente 1% p/p en PETG comercializado a 190°C. A continuación, las composiciones se moldearon por compresión a fin de formar películas con un grosor de aproximadamente 110 μm. Los espectros de absorción de estas películas se muestran en la figura 6. La diferencia entre el espectro de absorción de la THAQ en isopropanol (véase la figura 3, espectro "a") y estos derivados de antraquinona hidrogenada en PETG indica la formación de una especie química diferente en PETG, y dicha nueva especie se asigna a las formas enólicas de los derivados de antraquinona hidrogenada debido a su muy estrecha similitud con el espectro de absorción del tautómero enólico de la THAQ en DMSO, representado en la figura 3, espectro "b".

REIVINDICACIONES

1. Composición polimérica que comprende un derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato o un derivado sustituido del mismo;

en la que la composición polimérica contiene un polímero seleccionado de entre EVOH, poliamida, poliéster, polietileno, alcohol polivinílico y mezclas de los mismos; preferentemente, un polímero que comprende unidades de meta-xilendiamina y ácido adípico, un polímero que comprende unidades de ácido tereftálico y etilenglicol o EVOH; y

en la que el derivado de antraquinona hidrogenada se selecciona de entre uno o más de los compuestos representados por las fórmulas siguientes y sus derivados sustituidos:

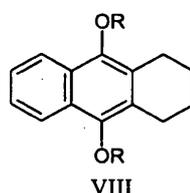
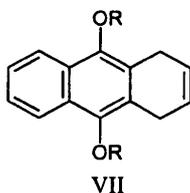


1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona 1,2,3,4,4a,9a-hexahidroantraquinona

2. Composición polimérica según la reivindicación 1, en la que el derivado de antraquinona hidrogenada es 1,4,4a,9a-tetrahidroantraquinona o un derivado sustituido de la misma.

3. Composición polimérica según la reivindicación 1 ó 2, en la que el derivado de antraquinona hidrogenada y/o su derivado de enol/enolato es un tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada o un derivado sustituido del mismo.

4. Composición polimérica según la reivindicación 3, en la que el tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada se selecciona de entre un compuesto de una de las fórmulas VII y VIII y sus derivados sustituidos:



en la que cada R se selecciona independientemente de entre hidrógeno, un ión de carga positiva, un enlace éster y un enlace éter.

5. Composición polimérica según la reivindicación 4, en la que el tautómero de enol/enolato de un derivado de antraquinona hidrogenada es un compuesto de la fórmula VII o un derivado sustituido del mismo.

6. Composición polimérica según la reivindicación 5, en la que el compuesto de fórmula VII es la sal disódica de fórmula VII.

7. Composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 6, que comprende además un ácido o una base.

8. Composición polimérica según la reivindicación 7, en la que la cantidad de ácido o base presente está comprendida en el intervalo de 0,05% a 1,0% en peso de la composición polimérica.

9. Composición polimérica según la reivindicación 8, en la que la cantidad de ácido o base presente está comprendida en el intervalo de 0,05% a 0,1% en peso de la composición polimérica.

10. Composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 7 a 9, en la que el ácido se selecciona de entre el grupo constituido por ácido clorhídrico, ácido benzoico, ácido p-toluensulfónico, cloruro de sodio, sulfato de potasio y cloruro de amonio.

11. Composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 7 a 9, en la que la base se selecciona de entre hidróxido de sodio y sales metálicas de carboxilatos, carbonatos y bicarbonatos.

12. Composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 11, en la que la composición polimérica no

comprende un catalizador de metal de transición.

13. Material de envasado que comprende una composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12.

5

14. Procedimiento de captura de oxígeno en una atmósfera o un líquido, que comprende la exposición de la atmósfera o del líquido a una composición polimérica según cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12, de manera que por lo menos una parte del oxígeno en la atmósfera o el líquido se elimina mediante la oxidación del derivado de antraquinona hidrogenada y/o su tautómero de enol/enolato.

10

15. Procedimiento de prevención de la transmisión del oxígeno a través de un envase, comprendiendo dicho procedimiento la formación de un envase que comprende o está constituido por un material de envasado según la reivindicación 13.

FIGURA 1

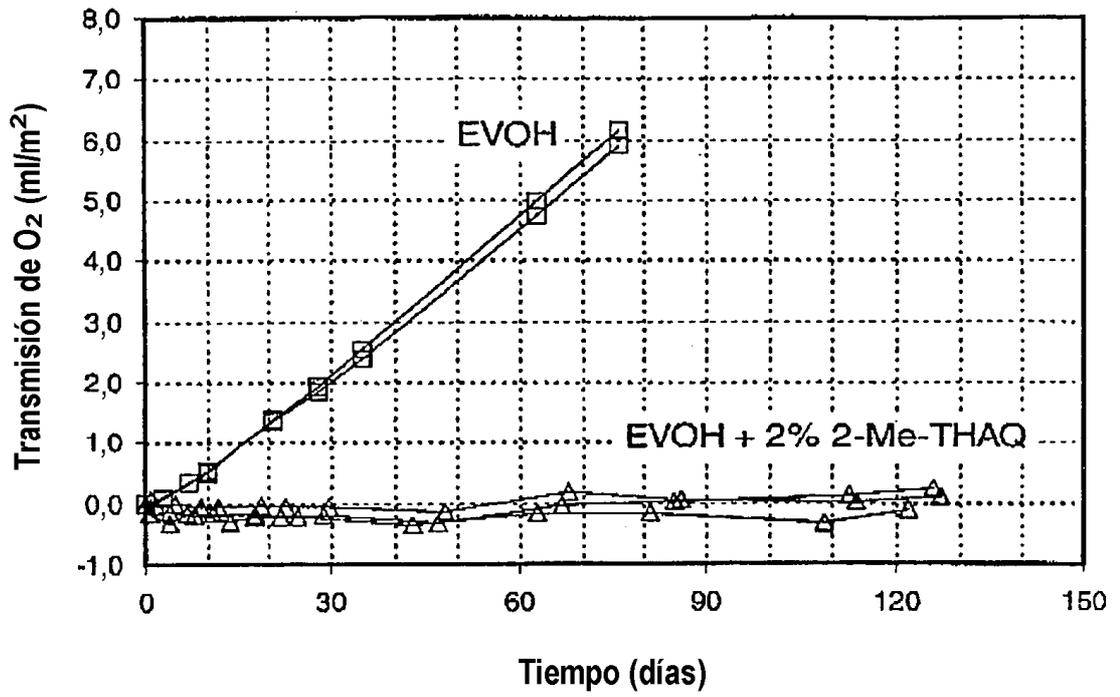


FIGURA 2

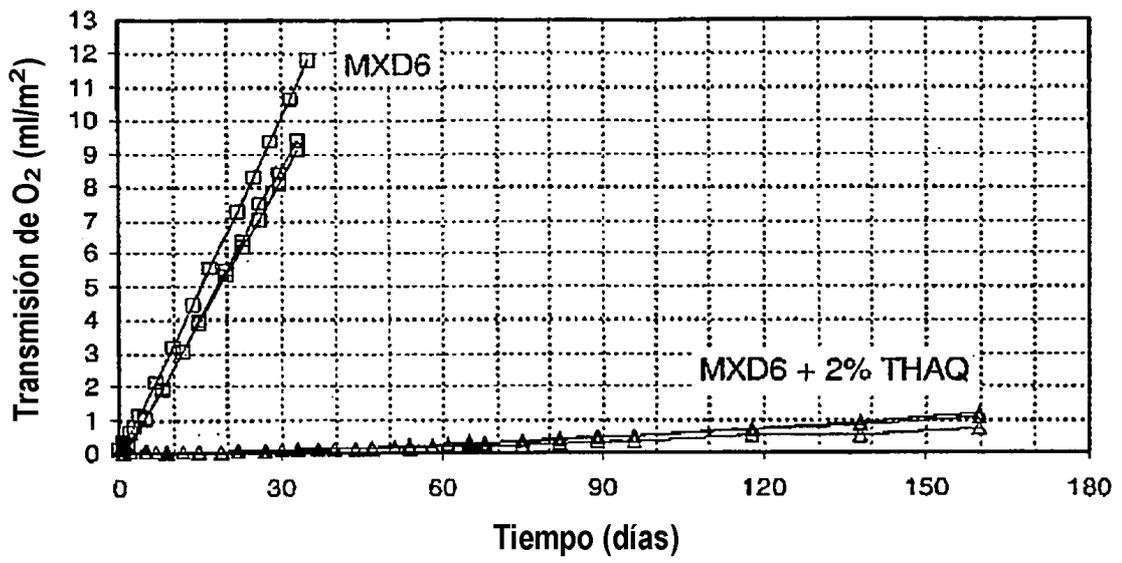


FIGURA 3

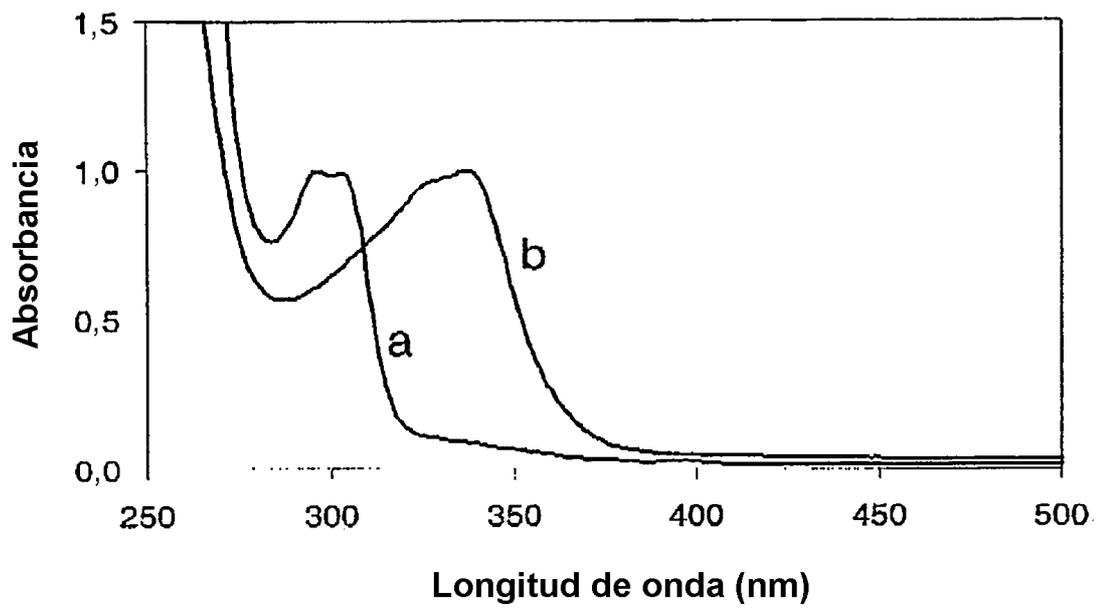


FIGURA 4

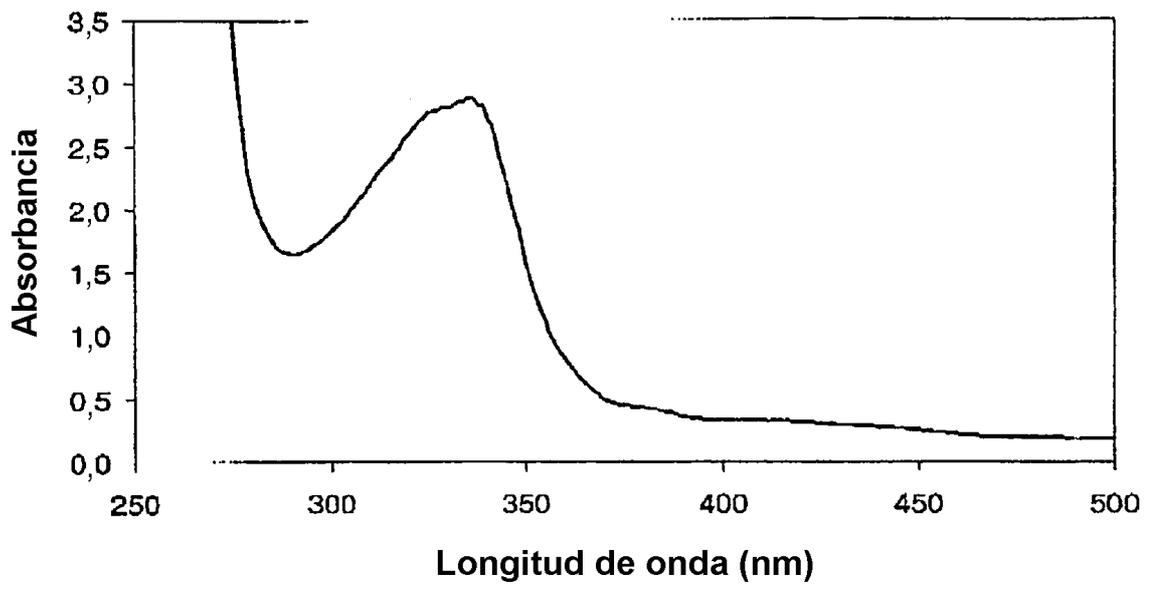


FIGURA 5

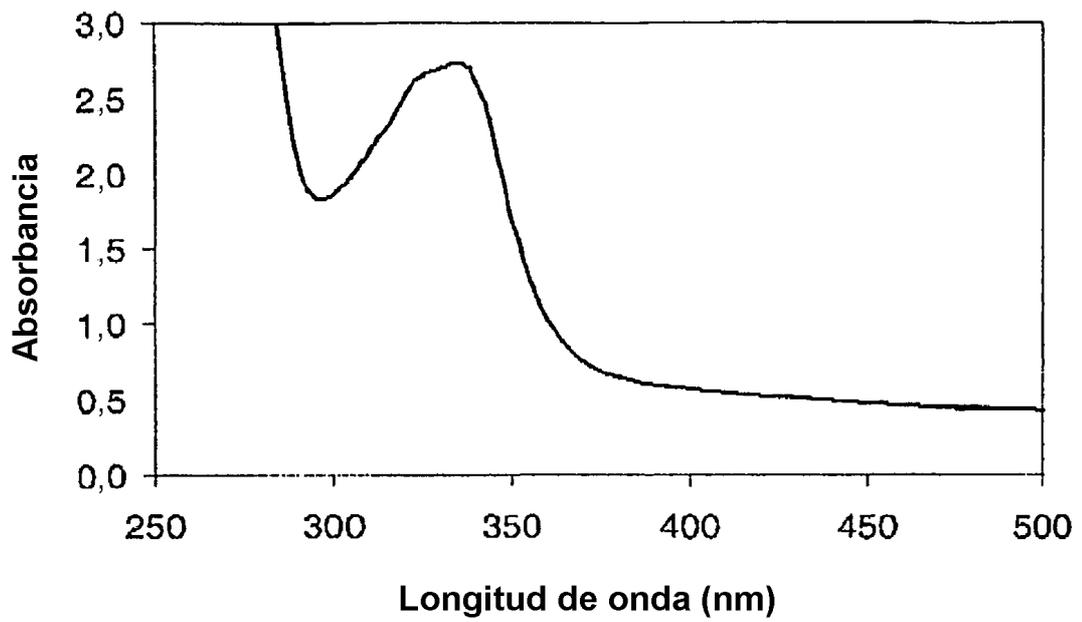


FIGURA 6

